

# Il servizio CrossFire al CILEA

**Francesca Bonini**

*CILEA, Segrate*

## Abstract

*In questo articolo è presentato il nuovo servizio CrossFire recentemente avviato al CILEA per la consultazione della versione elettronica del Beilstein Handbook. Nel seguito sono illustrate le principali caratteristiche del servizio, le modalità di accesso e le previsioni sui futuri sviluppi dello stesso.*

Come molti già sanno e come già annunciato in un articolo del Bollettino CILEA n. 61<sup>1</sup>, è stato attivato il nuovo servizio CrossFire. Tale servizio mette a disposizione degli enti di ricerca appartenenti al CIC (*Consorzio Italiano CrossFire*) la consultazione della versione elettronica del Beilstein Handbook.

Ricordiamo brevemente che il *"Beilstein Handbook der Organischen Chemie"* è uno dei più completi manuali contenente informazioni sulle proprietà chimiche e fisiche (come punto di fusione ed ebollizione, spettri identificativi) di circa sette milioni di sostanze organiche, nonché più di cinque milioni di reazioni e referenze bibliografiche per pubblicazioni nell'ambito chimico organico, dal 1779 ad oggi.

CrossFire, o meglio, nel nostro caso, **CrossFire<sub>plus</sub>Reactions**, è la versione "elettronica" di tale manuale, che consente una facile e veloce interrogazione del Beilstein grazie ad un'interfaccia grafica (Beilstein Commander) particolarmente "amichevole" nei confronti dell'utente.

Il CIC, infine, altro non è che un consorzio di enti di ricerca (Università, Politecnico e Dipartimenti CNR) nato dall'esigenza di usufruire del prodotto CrossFire suddividendo i costi dell'acquisto del prodotto stesso e della sua gestione, completamente demandata al CILEA.

<sup>1</sup> **"CrossFire<sub>plus</sub>Reactions**, un database per la ricerca chimica italiana" - G. Limongiello - Bollettino CILEA n. 61 - pagg. 13-16.

## CrossFire<sub>plus</sub>Reactions al CILEA

### Il server

Ricordiamo brevemente che il Server dedicato al Servizio CrossFire al CILEA è una WorkStation RS/6000 IBM dotata di dischi esterni per ospitare il database Beilstein; i dati salienti della configurazione del Server sono elencati nella tabella che segue.

Modello	Workstation RS/6000 IBM
Memoria RAM	128Mbyte
Disco di sistema	2 Gbyte
Dischi esterni	45 Gbyte RAID 5
Connessione in rete	FDDI a 100 Mbit/s
Sistema Operativo	AIX 4.2

### Il Prodotto

Il prodotto installato, **CrossFire<sub>plus</sub>Reactions**, sviluppato e distribuito dalla Beilstein Informationssysteme GmbH:

<http://www.beilstein.com>

è composto da due parti principali: il software di gestione e interrogazione più il database vero e proprio. Quest'ultimo è in continua evoluzione, infatti sono previsti 4 aggiornamenti annuali, che permettono di mantenere attuali i dati in linea. La versione attualmente installata sul server CILEA è quella relativa al primo quarto 1998.

A titolo di curiosità si noti che il tempo necessario all'aggiornamento completo dell'int-

ro database (circa 30 Gbyte di dati) è di circa di 10 ore.

### I servizi forniti dal CILEA

Il CILEA si occupa sia del lato amministrativo, che di quello tecnico e di supporto per la gestione di CrossFire. In particolare, per il lato amministrativo il CILEA è il contatto contrattuale e finanziario tra il Beilstein Information e i membri del CIC.

Dal punto di vista tecnico il CILEA ospita il server CrossFire, si occupa dell'installazione e dell'aggiornamento del software e del database, della amministrazione ordinaria del server e della connettività in rete, nonché della distribuzione (via rete) e personalizzazione del Client (Beilstein Commander) e dei manuali relativi.

Come supporto all'uso del prodotto, sono stati inoltre attivati da parte del CILEA:

- <http://xfire.cilea.it>, il sito WEB di informazioni per CrossFire e CIC. Qui si trovano gli "Avvisi", relativi allo stato di funzionamento del server e alle iniziative proprie del servizio fornito; la descrizione del "Server" CrossFire; tutte le informazioni riguardanti il "Client", disponibile per diverse piattaforme, i link per il suo recupero dalla rete e le istruzioni necessarie all'installazione; i "Manuali" del client e una breve guida introduttiva alla ricerca; una pagina di "Statistiche" sul funzionamento del servizio e, nuovissimo, gli "Strumenti" necessari per controllare se il proprio PC è stato abilitato all'uso di CrossFire e se lo username assegnato è attualmente in utilizzo<sup>2</sup>;
- [cic@cilea.it](mailto:cic@cilea.it), una mailing list per il CIC, lista cui possono accedere tutti e soli gli appartenenti al Consorzio Italiano Corssfire, utile per scambiare informazioni di interesse comune sul database e il suo utilizzo;
- un servizio di help desk, telefonico o via mail ([staff\\_cic@cilea.it](mailto:staff_cic@cilea.it)) a cui gli utenti CrossFire possono rivolgere domande di

carattere tecnico o amministrativo riguardo il servizio.

Il CILEA, infine, è a disposizione per definire attività di training per l'uso del prodotto; si veda, ad esempio, la pagina:

<http://www.cilea.it/novita/CROSSFIRE.html>

### Connessione al Database

La ricerca sul database Beilstein viene effettuata tramite il software Beilstein Commander, un'interfaccia grafica che fornisce un facile accesso al server. La ricerca sul database può essere fatta per "sostanze", usando la struttura della molecola d'interesse e/o le informazioni riguardanti le proprietà della sostanza; per "reazioni", o per "riferimenti bibliografici".

Nel database sono immagazzinati più di 30 milioni di report organizzati in circa 300 diversi campi di ricerca, che possono essere usati anche per costruire una ricerca per un particolare composto, o per una classe di composti.

Una rapida occhiata a come effettuare una ricerca può aiutare a comprendere le potenzialità del mezzo.

L'avvio del programma di ricerca viene fatto dal proprio PC (su cui è stato installato il Client) con un doppio clic sull'icona del

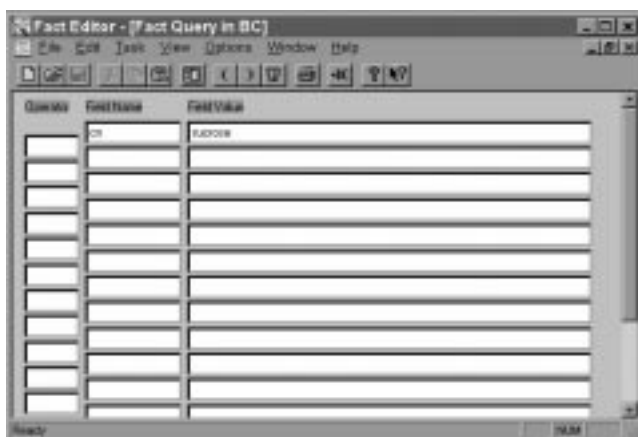


programma, si apre quindi la sessione:

Da cui è possibile avviare la connessione al server tramite il bottone:

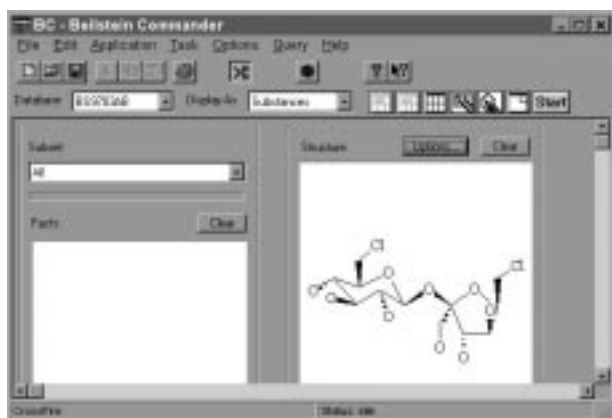
Una volta collegati al server si può impostare la ricerca utilizzando o il "Fact Editor" (finestra a sinistra nell'immagine precedente) in cui

<sup>2</sup> Si ricorda che l'accesso al Server è regolamentato in modo da non consentire più di una sessione di connessione contemporanea con lo stesso codice, pur permettendo l'utilizzo dello stesso (non contemporaneo) da più PC, i cui indirizzi andranno comunicati al CILEA dai titolari del servizio per essere esplicitamente abilitati.



definire i valori che le chiavi del database devono assumere per soddisfare la richiesta,

oppure lo "Structure Editor", che permette una ricerca partendo dal disegno di una molecola (o



parte di essa) o di una reazione.

Tramite il bottone "start" ha inizio la ricerca vera e propria, che come risultato fornisce tutti dati relativi alla sostanza/reazione cercata, organizzate in "hit", con hyperlink "navigabili" per reazioni, sostanze o citazioni, che forniscono una comoda alternativa allo sfogliare le centinaia di pagine di cui è composta la versione cartacea del manuale

Substance	
Beilstein Registry Number	4641426
Beilstein Reference ID	79412-97-4
CAS Registry Number	79412-97-4
Chemical Name	Potassium 11-((2,3,5-trimethyl-4-oxocyclopent-2-en-1-ylideneamino)carbamate
Beilstein Reference	6-08
Linear Structure Formula	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P <sub>2</sub> K <sub>2</sub>
Molecular Formula	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P <sub>2</sub> K <sub>2</sub>
Molecular Weight	426.62, 99.98
Compound SMILES	4634027, 3987732
Lawson Number	18235, 3122, 289
Entry Date	04.12.02
Update Date	05.02.15

Reaction	
Reaction ID	2812218
Reaction SMILES	4637268 C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P <sub>2</sub> K <sub>2</sub>
Reaction SMILES	4637268 C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P <sub>2</sub> K <sub>2</sub>

Beilstein.

### Primi risultati del servizio e prossimi sviluppi

Dopo due mesi di funzionamento "a regime" del servizio, è possibile una prima valutazione dello stesso. In cifre si è registrata una media di 40 accessi al giorno. Nel periodo di attività, il servizio ha subito una sola interruzione, di un giorno, per l'aggiornamento del database. L'interruzione è stata più lunga delle 10 ore previste per il caricamento del nuovo database a causa di un guasto imprevisto sull'unità nastro; si prevede di limitare le interruzioni per i successivi aggiornamenti allo stretto tempo necessario ed in orari o giornate non lavorativi. È inoltre stato tenuto il 10 giugno scorso un corso introduttivo per l'utilizzo del servizio<sup>3</sup>, che ha visto la partecipazione di oltre 60, tra ricercatori e studenti, già utilizzatori del servizio. Sono previste riedizioni di tale corso e sue evoluzioni a corso avanzato, a fronte di un manifesto interesse da parte degli utenti. È previsto anche un training approfondito sul prodotto, con docenti del Beilstein Information, rivolto ad un numero molto limitato di persone interessate, che si impegnino a tenere, in seguito, corsi sull'uso di CrossFire per gli aderenti al CIC.

Infine, è in fase avanzata di definizione la possibilità di ampliare l'attuale database in linea aggiungendo anche la parte di **abstract** degli articoli citati, dal 1980 ad oggi, e la messa in linea dell'analogo database **Gmelin**, collezione delle informazioni riguardanti composti inorganici e organometallici (dal 1772 ad oggi) contenute nel Gmelin Handbook.

Per ogni ulteriore informazione è possibile contattare il personale CILEA dedicato al servizio, all'indirizzo:

staff\_cic@cilea.it,

che comprende l'autore di questo articolo.

<sup>3</sup> Docente il Dott. Leonardo Manzoni del Dipartimento di Chimica Organica ed Industriale dell'Università degli Studi di Milano.